

As-H-O

1968

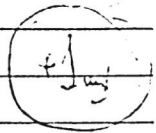
15 Б238. Спектры комбинационного рассеяния и структура мышьяковистой кислоты и арсенитов в водных растворах. Loeher Thomas M., Plane Robert A. Raman spectra and structures of ~~arsenious acid and arsenites~~ in aqueous solution. «Inorgan. Chem.», 1968, 7, № 9, 1708—1714 (англ.)

Получены спектры КР NaAsO_2 и As_4O_6 в тв. состоянии, а также спектры КР р-ров As_4O_6 в обычной и тяжелой воде с добавлением NaOH . Соотношении конц-ий $\text{OH}^-/[\text{As(III)}]$ меняли от 3,5 до 15. Установлено присутствие в р-вах As(OH)_3 , As(OH)_2^- , $\text{AsO}_2(\text{OH})^{2-}$ и AsO_4^{-3} . Выполнен теоретико-групповой анализ спектров КР и произведено отнесение наблюдаемых частот к различным типам колебаний. Изучение зависимости интенсивности линий от конц-ии As(III) в интервале 0,5—6,0 М показывает, что в основной среде полимеризация отсутствует.

А. Бобров

As(OH)_3
 As(OH)_2^-
 $\text{AsO}_2(\text{OH})^{2-}$

К.р.



х. 1969. 15



XIII - 1739

1968

 $\text{As}_4\text{O}_6 \cdot \text{H}_2\text{O}$

2 Д373. Исследование ИК-спектров и спектров комбинационного рассеяния некоторых соединений мышьяка. Szymanski H. A., Marabella L., Hoke J., Harter J. Infrared and Raman studies of arsenic compounds. «Appl. Spectrosc.», 1968, 22, № 4, 297—304 (англ.)

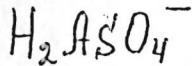
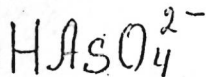
Изучены ИК-спектры и спектры комб. рас. (200—4000 см^{-1}) и протонного резонанса мышьяковистой кислоты, некоторых ее солей, а также трехокиси мышьяка. Показано, что из возможных форм мышьяковистой кислоты в водных растворах окислов мышьяка реализуются две: $\text{As}_4\text{O}_6 \cdot \text{H}_2\text{O}$ и $\text{As}(\text{OH})_3$. Присутствие мета-формы OAsOH не подтверждено. Отнесение частот в спектре мышьяковистой кислоты проведено на основе сравни-

09. 1969

270

тельного анализа спектров селенистых и мышьяковистых кислот. Обнаружено, что добавление галогенидов щелочных металлов в водные растворы окислов мышьяка приводит к образованию орто-арсенитов, наиболее стабильной формой которых является M_3AsO_3 . В твердом состоянии эта форма характеризуется тем, что атом мышьяка окружен шестью атомами кислорода. Библ. 14.

Б. И. Лифмендчик



XIII - 2315

1972

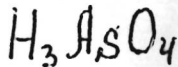
Mielke, Z.;

Ratajczak, H.

"Bull. Acad. Pol. Sci, Ser. Sci.
Chim." 1972, 20, N3, 265-70.

(Vi; c.n.)

(see AsO_4^{3-} , III)



XIII - 298

1973

(14 Б186.) Анализ нормальных колебаний мышьяковой кислоты и ее анионов. I. Спектры комбинационного рассеяния. Vansant F. K., Veken B. J. van der, Desseyn H. O. Vibrational analysis of arsenic acid and its anions. I. Description of the Raman spectra. «J. Mol. Struct.», 1973, 15, № 3, 425—437 (англ.)

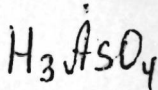
Исследованы спектры КР в области 50—1000 см⁻¹ мышьяковой к-ты и ее анионов в водн. р-рах и крист. состоянии. Для определения точных значений частот перекрывающихся полос выполнен анализ контуров полос в области вал. кол. As—O (700—950 см⁻¹) по модифицированному методу наименьших квадратов, с использованием комбинации функций Гаусса и Каши. Проведено

Х. 1973 № 14



по отнесение полос в спектрах H_3AsO_4 (I), AsO_4^{3-} (II), HAsO_4^{2-} (III), H_2AsO_4^- (IV). Частоты вал. кол. As—O наблюдаются при 923 см^{-1} в I, 791 (симм.) и 818 (асимм.) в II, частоты вал. симм. и асимм. кол. $\text{As}(\text{OH})_3$ в I — соотв. при 769 и 808 см^{-1} , $\text{As}(\text{OH})_2$ в IV — при 745 и 765 см^{-1} , AsO_2 в IV — при 875 и 915 см^{-1} , и AsO_3 в III — при 838 и 866 см^{-1} . Полосы при 881 см^{-1} в I и 843 см^{-1} в IV отнесены к колебаниям различных типов полимеров, а полоса 811 см^{-1} в III — к колебаниям водородно-связанных анионов.

Е. С. Ефремов



XIII - 2199

1973

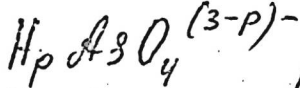
(14 Б187.) Анализ нормальных колебаний мышьяковой кислоты и ее анионов. II. Анализ нормальных координат. Vansant F. K., Veken B. J. van der. Vibrational analysis of arsenic acid and its anions. II. Normal coordinate analysis. «J. Mol. Struct.», 1973, 15, № 3, 439—444 (англ.)

С.Н.

Приближенным (кинсматич.) методом Бехера—Маттеса вычислены силовые постоянные молекул H_3AsO_4 и ионов AsO_4^{3-} , HAsO_4^{2-} и H_2AsO_4^- . Вычислено также распределение потенциальной энергии колебаний по внутренним координатам симметрии и дано отнесение частот по форме колебаний. Рассмотрена корреляция между валентной силовой постоянной и порядком связи As—O. Сосбщ. I сем. пред. реферат. М. Р. Алиев

(+2) ☒

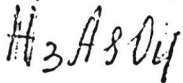
Х. 1973 N 14



Ж 4-18058

1977

$p = 0, 1, 2, 3.$



Химическая
связь

9 Д175. Химическая связь в некоторых простых соединениях As—O. Van der Veken B. J., Van-sant F. K., Herman M. A. The chemical bonding in some simple As—O compounds. «J. Mol. Struct.», 1977, 36, № 2, 225—232 (англ.)

Определены значения силовых постоянных для связи As—O в следующих соединениях $\text{H}_p \text{AsO}_4^{(3-p)-}$, $p = 0, 1, 2, 3$; $\text{CH}_3 \text{AsO}_3^{(2-p)-}$, $p = 0, 1, 2$; $\text{CH}_3 \text{AsO}_2^{(1-p)-} \text{H}_p$, $p = 0, 1$; $(\text{CH}_3)_2 \text{AsO}$; $\text{AsO}(\text{OCH}_3)_3$, $\text{CH}_3 \text{AsO}(\text{OCH}_3)_3$, $(\text{CH}_3) \text{AsO}(\text{OCH}_3)$. По эмпирич. ф-лам Зибберта вычислены значения порядков связей As—O в этих соединениях. Показано, что связь As—O носит приближенно двойной характер, и ее порядок зависит как от заряда соединения, так и от природы лигандов. И. Станкевич

Ф 1977 № 9

H₃AsO₄
(log. p-p)

u.k. camp

number 7892

1979

Leuchs H., et al.

Can. J. Chem.,
1979, 57, 487-93.

HAsO_3

[OM 34823] 1990

струк-
тура,
электрон.
свойства,
расчет.

Jarnett-Sprague S.A.,
Millier I.H., et al.

Chem. Phys. Lett.
1990, 170, N1, 35-38.

H_3AsO

1990

22 Б1028. Неэмпирические расчеты гармонических силовых полей и колебательных спектров оксидов и сульфидов мышьяка R_3AsY ($\text{R}=\text{H}, \text{F}$; $\text{Y}=\text{O}, \text{S}$) и родственных соединений. Ab initio calculation of harmonic force fields and vibrational spectra for the arsine oxides and sulfides R_3AsY ($\text{R}=\text{H}, \text{F}$; $\text{Y}=\text{O}, \text{S}$) and related compounds / Schneider Winfried, Thiel Warter, Komornicki Andrew // J. Phys. Chem.— 1990.— 94, № 7.— С. 2810—2814.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП с использованием эффективного остоного ПТ для остоных электронов и двухэкспонентного базиса, дополненного поляризац. ф-циями, для валентных электронов атомов As и S и стандартного базиса 6—31 ГФ* для остальных атомов проведены расчеты ряда соединений мышьяка: H_3As (I), H_3AsO (II), H_3AsS (III), F_3As (IV), F_3AsO (V), F_3AsS (VI), цис- и транс- H_2AsOH (VII) и HAsO (VIII). Рассчитанные значения равновесных геометрич. пара-

М.П.

13

X. 1990, N 22

метров, вращательных постоянных, частот колебаний и их интенсивностей, постоянных Кориолиса центробежного искажения, а также силовые поля молекул I—VIII хорошо согласуются со спектральными данными. Наилучшее согласие получено для молекул I и IV. На основании анализа рассчитанных частот колебаний возможных изотопомеров двух изомеров VII, VIII и III дана новая интерпретация нек-рых полос в ИК-спектре III. Библ. 40.

И. Н. Сенченя



H_3AsO

1990

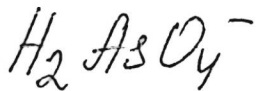
, 112:167985t Ab initio calculation of harmonic force fields and vibrational spectra for the arsine oxides and sulfides R_3AsY ($R = H, F$; $Y = O, S$) and related compounds. Schneider, Winfried; Thiel, Walter; Kemornicki, Andrew (Theor. Chem., Bergische Univ.Gesamthochsch., D-5600 Wuppertal, 1 Fed. Rep. Ger.). *J. Phys. Chem.* 1990, 94(7), 2810-14 (Engl). Ab initio SCF calcs. using effective core potentials and polarized double-basis sets are reported for H_3As , H_3AsO , H_3AsS , F_3As , F_3AsO , F_3AsS , *cis*- and *trans*- H_2AsOH , and $HAsO$. The calcd. geometries, rotational consts., vibrational frequencies, Coriolis coupling consts., centrifugal distortion consts., IR band intensities, and force fields were compared with the available exptl. data. Agreement was found in the case of the known mols., esp. H_3As and F_3As , so that the predictions for the unknown mols. are expected to be realistic. The theor. results confirmed a recent spectroscopic identification of H_3AsO , H_2AsOH , and $HAsO$ and suggest reassignment of several obsd. frequencies.

расчет мо-
лекулы,
колебан. и
р. вращ. (43)

c.A. 1990, 112, N 18

H_3AsS , F_3AsO ,
 F_3AsS

1992



Щербаков Б.Ф.,

Лазарев А.Н.

и.п. ЖС. структур. химия
1992. 33, № 6. С. 184-186.

(ссылка: AsO_4^{3-} ; III)